

Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse satellitengestützter Treibhausgasmessungen

Malin Ingendahl

30. Juni 2022 Universität Bremen Fachbereich 1: Physik und Elektrotechnik

Studiengang:

Erstgutachter: Zweitgutachterin: Abgabedatum: Bachelor mit Lehramtsoption Gy./OS Physik und Mathematik Dr. Reuter PD Dr. Ladstätter-Weißenmayer 09.12.2021

Zusammenfassung

Hinsichtlich der Quellen und Senken von Kohlenstoffdioxid (CO₂) bestehen derzeit große Unsicherheiten, welche durch Satelliten- und Bodenmessungen verringert werden sollen. Die Messungen des Satelliten werden mit Bodenmessungen, beispielsweise denen des "Total Carbon Column Observing Network" (TCCON), validiert. Die Abweichungen der Messungen zwischen den Instrumenten werden in einen stochastischen und systematische Fehler segmentiert. In dieser Arbeit wird der Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse untersucht. Als Grundlage werden Kollokationen der XCO₂-Messungen des OCO-2 FOCAL und TCCON verwendet. In der Programmiersprache Python wurde die von Reuter et al. (2019) entwickelte Validationsmethode, welche neben einem stochastischen Anteil einen systematischen regionalen Fehler, linearen Drift und saisonale Schwankungen enthält, reproduziert. Die erzeugten Validationsergebnisse stimmten mit den von Reuter (2021) veröffentlichten Ergebnissen überein. Ergänzend wurden tägliche, wöchentliche und monatliche Mittelwerte der Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Tagesmittelwerte berechnet und gleichermaßen validiert. Dabei wurden die Ergebnisse für verschiedene Mittlungen der Einzelmessungen sowie die der unterschiedlich erzeugten Monatsmittelwerten verglichen. Im Gesamtergebnis konnte kein wesentlicher Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse festgestellt werden. An einzelnen TCCON-Stationen wurden hinsichtlich der Mittlung Unterschiede in den systematischen Fehlern beobachtet. Diese wurden auf unzureichendes Erfassen der Fehler durch eine geringe Anzahl an Mittelwerten zurückgeführt. Die empirisch bestimmte Messunsicherheit von OCO-2 FOCAL zeigte eine Abnahme bei Vergrößerung des Mittlungsintervalls. Die Unsicherheit ist jedoch größer als die unter der Annahme unkorrelierter Messungen berechnete. In einer genaueren Untersuchung wurde die Abnahme der Messunsicherheit in Abhängigkeit von der Anzahl gemittelter Werte in Residuen für die TCCON-Station in Lamont (USA) betrachtet. Für die Tagesmittelwerte wurde eine Übereinstimmung mit den theoretischen Erwartungen festgestellt. Die weiteren Datensätze zeigten Abweichungen, welche durch zeitliche Korrelationen der Einzelmessungen sowie Antikorrelationen der Wochen- und Monatsmittelwerte erklärt wurden.

Inhaltsverzeichnis

1.	Einl	eitung		1
2.	The	oretiscł	her Hintergrund	3
	2.1.	Kohler	stoffdioxid	3
	2.2.	TCCO	N	4
	2.3.	OCO-2	2 und FOCAL	4
3.	Date	en		6
	3.1.	Datenr	nittlung	6
4.	Valio	dations	methode	8
5.	Erge	ebnisse		11
	5.1.	Validat	tionsergebnisse der Einzelmessungen und Vergleich mit	
		frühere	en Ergebnissen	11
	5.2.	Einflus	ss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse .	14
		5.2.1.	Validationsergebnisse für verschiedene zeitliche Mittlun-	
			gen auf Basis von Einzelmessungen	15
		5.2.2.	Validationsergebnisse für Monatsmittelwerte auf Basis	
			von Tagesmittelwerte	23
	5.3.	Statisti	sche Unabhängigkeit für verschiedene Mittlungsintervalle	28
6.	Fazi	t		30
Lit	eratu	ır		34
Α.	Anh	ang		35

I

Tabellenverzeichnis

4.1.	Für die Validation verwendete TCCON-Stationen mit Höhe, Länger	า-
	und Breitengrad	10
5.1.	Anzahl der Kollokationen $n_{\rm col}$ und Tagen, für die Messergebnisse	
	vorliegen, n_{Tage} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jahreszeitliche Ab-	
	weichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} , räumlich-zeitlicher Fehler	
	$\Delta_{ m spt}$ und ermittelte Messunsicherheit $\sigma_{ m FOCAL}$ für Darwin (Austra-	
	lien), Edwards (USA), Lauder (Neuseeland), Lamont (USA) und	
	das Gesamtergebnis	13
5.2.	Gesamtergebnisse der Validation nach Reuter (2021) und eigene	
	Validationsergebnisse	14
5.3.	Anzahl an Kollokationen n_{col} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jah-	
	reszeitliche Abweichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} und ermit-	
	telte Messunsicherheit $\sigma_{ m FOCAL}$ für Darwin (Australien), Edwards	
	(USA), Lauder (Neuseeland), Lamont (USA) und das Gesamter-	
	gebnis für Einzelmessungen und Tages-, Wochen- und Monats-	
	mittelwerte der Einzelmessungen	19
5.4.	Anzahl an Kollokationen n_{col} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jah-	
	reszeitliche Abweichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} und ermit-	
	telte Messunsicherheit $\sigma_{ m FOCAL}$ für Darwin (Australien), Edwards	
	(USA), Lauder (Neuseeland), Lamont (USA) und das Gesamter-	
	gebnis für Monatsmittelwerte der Einzelmessungen und Tages-	
	mittelwerten	26
A.1.	Validationsergebnisse und Anzahl der Kollokationen n_{col} aller	
	verwendeten TCCON-Stationen	44

Abbildungsverzeichnis

5.1.	XCO ₂ -Messungen des OCO-2 FOCAL (rot) mit kolokalisierten	
	TCCON-Messungen (schwarz) für den Validationszeitraum 2015	
	bis 2020	11
5.2.	Differenz ΔXCO_2 zwischen den FOCAL- und TCCON-Messungen	
	und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für die Stationen	
	in Lamont (USA) und Darwin (Australien)	12
5.3.	Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der	
	XCO ₂ -FOCAL-Messungen in Lamont (USA) und Darwin (Aus-	
	tralien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020	15
5.4.	Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der	
	XCO ₂ -Messungen der TCCON-Stationen in Lamont (USA) und	
	Darwin (Australien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020	16
5.5.	Relative Häufigkeit der OCO-2 FOCAL und TCCON-Differenz	
	mit zugehöriger Gaußschen Normalverteilung (oben) und Ver-	
	gleich der XCO ₂ -FOCAL- und TCCON-Messungen mit orthogo-	
	naler linearer Regression und Darstellung des 1:1-Verhältnisses	
	(unten) für verschiedene zeitliche Mittlungen der Einzelmessun-	
	gen unter Verwendung aller Stationen	17
5.6.	Differenz ΔXCO_2 zwischen den FOCAL- und TCCON-Messungen	
	für verschiedene Mittlungen und dazugehörige Fit-Funktion nach	
	Modell 3 für die Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Aus-	
	tralien)	18
5.7.	Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an	
	Kollokationen und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der Einzel-	
	messungen und Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der	
	Einzelmessungen für Lauder (Neuseeland), Darwin (Australi-	
	en), Edwards (USA), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis .	22
5.8.	Einzelmessungen und monatlich gemittelte Einzelmessungen	
	und Tagesmittelwerte der XCO ₂ -Messungen von OCO-2 FOCAL	
	in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validations-	
	zeitraum 2015 bis 2020	23

5.9.	Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen	
	und Tagesmittelwerte der XCO_2-Messungen der TCCON-Stationen	
	in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validations-	
	zeitraum 2015 bis 2020	24
5.10.	FOCAL-TCCON-Differenz ΔXCO_2 für monatlich gemittelte Ein-	
	zelmessungen und Tagesmittelwerte mit dazugehörigen Fit-Funktio	nen
	nach Modell 3 für die Stationen in Lamont (USA) und Darwin	
	(Australien)	25
5.11.	Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an	
	Kollokationen und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der monat-	
	lich gemittelten Einzelmessungen und Tagesmittelwerten für	
	Lauder (Neuseeland), Darwin (Australien), Edwards (USA), La-	
	mont (USA) und das Gesamtergebnis	27
5.12.	Messunsicherheiten σ_{FOCAL} gegen die Anzahl der gemittelten	
	Werte n in den Residuen und theoretisch erwartete Messunsi-	
	cherheiten für Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monats-	
	mittelwerte in Lamont (USA)	28
A.1.	XCO ₂ -Messungen des OCO-2 FOCAL (rot) mit kolokalisierten	
	TCCON-MessungenallerverwendetenTCCON-Stationen(schwarz and the stational station and the stational stational station and the stational stati	z)
	für den Validationszeitraum 2015 bis 2020	35
A.2.	Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der	
	XCO ₂ -Messungen von OCO-2 FOCAL an allen verwendeten	
	TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020	36
A.3.	Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der	
	XCO ₂ -Messungen der verwendeten TCCON-Stationen für den	
	Validationszeitraum 2015 bis 2020	37
A.4.	Abweichung zwischen OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen	
	ΔXCO_2 und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für ver-	
	schiedene Mittlungen der Einzelmessungen an allen verwende-	
	ten TCCON-Stationen	38
A.5.	Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an	
	Kollokationen $n_{\rm col}$ und erwartete Messunsicherheit $\sigma_{\rm rep}$ der Ein-	
	zelmessungen und Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte für	
	alle verwendeten Stationen und das Gesamtergebnis	39

A.6.	Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen	
	und Tagesmittelwerte der XCO ₂ -Messungen von OCO-2 FOCAL	
	an allen verwendeten TCCON-Stationen für den Validationszeit-	
	raum 2015 bis 2020	40
A.7.	Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen	
	und Tagesmittelwerte der XCO2-Messungen der verwendeten	
	TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020	41
A.8.	Abweichung zwischen OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen	
	ΔXCO_2 und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für mo-	
	natlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte an al-	
	len verwendeten TCCON-Stationen	42
A.9.	Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an	
	Kollokationen $n_{ m col}$ und erwartete Messunsicherheit $\sigma_{ m rep}$ der mo-	
	natlich gemittelten Einzelmessungen und Tagesmittelwerte für	
	alle verwendeten Stationen und das Gesamtergebnis	43

Glossar

CO ₂	Kohlenstoffdioxid
XCO ₂	Column-averaged dry-air mole fraction
H_2O	Wasser
O ₂	Molekularer Sauerstoff
OCO-2	Orbiting Carbon Observatory
FOCAL	Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval
TCCON	Total Carbon Column Observing Network
NASA	National Aeronautics and Space Administration
ODR	Orthogonal Distance Regression

1. Einleitung

Im Jahre 2019 erreichte die jahresdurchschnittliche, globale Kohlenstoffdioxidkonzentration einen Wert von $(409,9 \pm 0,4)$ ppm und ist damit um ungefähr 47 % seit 1750 gestiegen (vgl. Gulev et al. (2021)). Obwohl CO₂ den größten Anteil am anthropogenen Treibhauseffekt hat, gibt es noch immer große Unsicherheiten bezüglich dessen Quellen und Senken. Satellitengestützte Messungen des säulengemittelten Mischungsverhältnisses von CO2 in trockener Luft (XCO2) können bei der Reduktion dieser Unsicherheiten helfen. Die satellitengestützten Messungen werden üblicherweise durch Bodenmessungen validiert. Abweichungen können dabei in systematische und stochastische Komponenten unterteilt werden. Systematische Abweichungen werden durch wiederholtes Vorkommen charakterisiert und bleiben somit beispielsweise bei zeitlicher Mittlung bestehen, wohingegen stochastische Unsicherheiten durch die Mittlungen der Werte abnehmen. Untersuchungen des Einflusses der zeitlichen Mittlung ermöglichen daher Rückschlüsse auf die Stabilität der Validationsergebnisse und den Grad der statistischen Unabhängigkeit der Messungen. So können weitere systematische Fehler, die möglicherweise nicht durch die Validation erfasst wurden, erkannt werden.

In dieser Bachelorarbeit wird der Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse satellitengestützter Treibhausgasmessungen am Beispiel von XCO₂-Messungen des "Orbiting Carbon Observatory-2"(OCO-2), generiert durch den "Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval"(FOCAL)-Algorithmus, untersucht. Dabei wird zunächst eine theoretische Einführung in Kohlenstoffdioxid sowie die XCO₂-Messungen von OCO-2 FOCAL und dem "Total Carbon Column Observing Network"(TCCON) gegeben. Anschließend wird die von Reuter et al. (2019) entwickelte Validationsmethode der Satellitenmessungen beschrieben. Die Methode wird im Rahmen dieser Bachelorarbeit in der Programmiersprache Python implementiert und um zusätzliche Analysen erweitert. Zunächst wird die Methode, analog zu den Arbeiten von Reuter et al. (2019), auf nicht zeitlich gemittelte Satellitenmessungen angewendet. In einem Vergleich der Ergebnisse mit denen in Reuter (2021) veröffentlichten Daten, wird die Funktionsfähigkeit der Python Implementierung geprüft. Aus den Einzelmessungen werden zeitliche Mittelwerte gebildet, mit dem selben Verfahren validiert und mit den Validationsergebnissen der Einzelmessungen verglichen und diskutiert. Anschließend wird der Einfluss der Mittlung auf die stochastische Unsicherheit am Beispiel von Validationsdaten an der TCCON Station in Lamont (USA) näher untersucht. Im abschließenden Fazit werden die Ergebnisse und Schlussfolgerungen der Arbeit zusammengefasst.

2. Theoretischer Hintergrund

In dieser Arbeit wird unter dem Begriff "Unsicherheit" ein stochastischer Fehler verstanden. Alle Unsicherheiten ergeben sich aus der Standardabweichung und sind in der 1- σ -Umgebung angegeben. Als "Fehler" werden systematische Fehler bezeichnet und dessen Berechnung in den jeweiligen Abschnitten beschrieben.

2.1. Kohlenstoffdioxid

Kohlenstoffdioxid (CO₂) ist das wichtigste anthropogene Treibhausgas und liefert durch zunehmende Konzentration in der Atmosphäre einen wesentlichen Beitrag zum globalen Temperaturanstieg (vgl. Canadell et al. (2021)). 2019 wurde eine Konzentration von $(409,9 \pm 0,4)$ ppm beobachtet (vgl. Gulev et al. (2021)). Im Kohlenstoffzyklus findet ein Austausch von CO₂ zwischen verschiedenen Reservoiren, beispielsweise der Vegetation der Landmassen und dem Ozean, statt. Dazu stellen anthropogene Emissionen, z.B. durch Nutzung fossiler Brennstoffe, eine der größten CO₂-Quellen dar (vgl. Canadell et al. (2021)). Da die Aufnahme von Kohlenstoffdioxid durch Photosynthese von der Vegetationsperiode abhängig ist, ergeben sich jahreszeitliche Schwankungen der atmosphärischen CO2-Konzentration. Diese Schwankungen sind auf der Nordhemisphäre durch einen größeren Anteil an Landmassen im Vergleich zur Südhemisphäre stärker ausgeprägt (vgl. Gulev et al. (2021)). Außerdem lassen sich tageszeitliche Schwankungen, z.B. aufgrund der Abhängigkeit photosynthetischer Prozesse von der Sonneneinstrahlung, im atmosphärischen CO₂-Anteil feststellen. Derzeit bestehen bei den Quellen und Senken, insbesondere der Land-Senke, große Unsicherheiten (vgl. Noël et al. (2021), Reuter et al. (2014)). Messungen der CO₂-Konzentration, beispielsweise über Satelliten und Bodenmessstationen, können darüber Aufschluss geben.

2.2. TCCON¹

Das "Total Carbon Column Observing Network" ist ein globales Netzwerk an Bodenmessstationen, welches unter Anderem XCO₂-Messungen mit Hilfe von Fernerkundungsverfahren macht. XCO₂ steht für "column-averaged dry-air mole fraction" und bezeichnet die Anzahl an CO₂-Molekülen in einer atmosphärischen vertikalen Luftsäule dividiert durch die Anzahl an Luftmolekülen exklusive H₂O (Wasser). Über Fouriertransformations-Spektrometer werden Absorptionsspektren im Nah-Infrarot-Bereich erzeugt, aus denen die CO₂-Konzentration berechnet werden kann. Für XCO₂-Messungen liegt die Netzwerk-Unsicherheit bei $\pm 0,4$ ppm und für Einzelmessungen bei < 0,25 % (Wunch et al. (2010)).

2.3. OCO-2 und FOCAL

"Orbiting Carbon Observatory-2" (OCO-2) ist ein Satellit der "National Aeronautics and Space Administration" (NASA), welcher durch Spektralanalysen im Nah-Infrarot-Bereich XCO₂-Messungen ermöglicht (vgl. Crisp et al. (2017)). Dabei analysiert der "Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval" (FOCAL)-Algorithmus (Reuter et al. (2020)) die von OCO-2 gewonnen Spektren des reflektierten Sonnenlichtes. Insbesondere die Tiefe der Absorptionslinien von CO_2 und O_2 ermöglichen Rückschlüsse auf die CO₂-Konzentration. Dennoch können Messungen durch Streuung entlang des Lichtweges, beispielsweise an Aerosolen oder Wolken, beeinflusst werden, wodurch strenge Qualitätsfilter erforderlich sind. FOCAL modelliert diverse Streueffekte an einer optisch dünnen Schicht und differenziert zwischen Reflexion an der Streuschicht und Erdoberfläche. Durch Berücksichtigung dieser Effekte werden präzisere XCO₂-Messungen generiert.

OCO-2 umläuft in einem 16-Tages-Zyklus die gesamte Erde. Dies ermöglicht

¹Die Inhalte dieses Abschnittes basieren auf der Literatur Wunch et al. (2011), sofern dies nicht anders gekennzeichnet ist.

das Detektieren regionaler CO₂-Quellen und -Senken auf dem gesamten Planeten. Der Satellit misst in einem sonnensynchronen Orbit unter wolkenfreien Bedingungen, wodurch tageszeitliche Schwankungen in den XCO₂-Messungen weitgehend vermieden werden (vgl. Wunch et al. (2017)).

3. Daten

Bei den verwendeten Daten in dieser Bachelorarbeit handelt es sich um XCO₂-Messungen des OCO-2-Satelliten, welche durch den FOCAL-Algorithmus Version 09 (FOCAL v09) generiert wurden (Reuter et al. (2017b), Reuter et al. (2017a), Reuter et al. (2021)). Die Messungen wurden in der Zeit vom Januar 2015 bis einschließlich Mai 2020 erhoben. Nach den in Abschnitt 4 beschriebenen Kriterien wurden die Daten von Dr. Maximilian Reuter mit TCCON-Messungen (Version GGG2014) kolokalisiert und im Rahmen dieser Arbeit zur Verfügung gestellt.

3.1. Datenmittlung

Für die Kollokationen der OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen (im Folgenden als FOCAL- und TCCON-Messungen bezeichnet) wurden tägliche, wöchentliche und monatliche arithmetische Mittelwerte berechnet. Dabei wurden die Zeiten ebenfalls gemittelt. Somit wird einer gemittelten kolokalisierten Messung nicht die mittlere Zeit des Mittlungsintervalls zugeordnet, sondern der Mittelwert von den Zeiten, an denen innerhalb des Intervalls Satelliten- und TCCON-Messdaten erhoben wurden. Die geschätzte FOCAL-Unsicherheit für die Mittelwerte σ'_{rep} wurde folgendermaßen bestimmt:

$$\sigma_{\rm rep}' = \sqrt{\frac{\overline{\sigma_{\rm rep}}^2}{n}} \tag{1}$$

Dabei entspricht *n* der Anzahl an gemittelten Messungen. σ_{rep} entspricht der angegebenen Unsicherheit der einzelnen Messungen. Um zu gewährleisten, dass ausreichend Einzelmessungen an einer Station vorhanden sind, wurde eine Mindestanzahl an Messungen pro Mittlungsintervall festgelegt. Diese lag bei 10 für die Tagesmittelwerte, 30 für die Wochenmittelwerte und 50 für die Monatsmittelwerte.

Des Weiteren wurde ein zweiter Datensatz an Monatsmittelwerten aus den Tagesmittelwerten nach gleichem Verfahren erzeugt. Da das Kriterium für ausreichend Einzelmessungen bereits für die Berechnung der Tagesmittelwerte berücksichtigt wurde, wurde dies bei dem Erzeugen der Monatsmittelwerte vernachlässigt.

4. Validationsmethode

Für die Validation wurde die von Reuter et al. (2019) entwickelte Methode verwendet. Dabei werden Satelliten- und TCCON-Messungen kolokalisiert. Jeder Satellitenmessung wird eine TCCON-Messung zugeordnet, welche in einem zeitlichen Abstand von maximal zwei Stunden in einer maximalen Entfernung von 500 km erfolgte. Dazu beträgt der Höhenunterschied zwischen der TCCON-Station und dem Messbereich des Satelliten maximal 250 m. Des Weiteren werden die Satelliten- und TCCON-Messungen auf ein gemeinsames a priori Profil gebracht und somit die Empfindlichkeit der Instrumente in Abhängigkeit von der Höhe berücksichtigt. Die Differenz zwischen den Satelliten- und TCCON-Messungen $\Delta XCO_2 = XCO_{2Sat} - XCO_{2TCCON}$ wird in einen möglichen mittleren Fehler, systematische saisonale Abweichungen, einen linearen Drift und einen stochastischen Fehler für jede Station unterteilt und kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\Delta XCO_2 = a_0 + a_1 \cdot t + a_2 \cdot \sin(2\pi \cdot t + a_3) + \varepsilon$$
⁽²⁾

Dabei entspricht a_0 einer zeitlich konstanten Abweichung. Der Term $a_1 \cdot t$, wobei t der Zeit in Jahren entspricht, beschreibt den zeitlich linearen Anstieg der Abweichung. Die jahreszeitlichen Schwankungen der Abweichung werden durch $a_2 \cdot \sin (2\pi \cdot t + a_3)$ modelliert. Die Amplitude der saisonalen Schwankung wird durch a_2 und die Phasenverschiebung durch a_3 dargestellt. Das Residuum ε entspricht dem stochastischen Anteil der Abweichung, welcher nicht durch die systematischen Komponenten des Fehlermodells erklärt werden kann.

Für die Validation wurden nur TCCON-Stationen zugelassen, bei denen mindestens 1000 Kollokationen über einen Zeitraum von mindestens zwei Jahren vorliegen. Da durch die zeitliche Mittlung eine Mindestanzahl von 1000 Messwerte innerhalb von zwei Jahren nicht möglich ist, wurde dieses Kriterium für die Mittelwerte vernachlässigt. In Tabelle 4.1 werden die verwendeten Stationen mit dazugehörigen Informationen dargestellt. Des Weiteren wurde das folgende mathematisch äquivalente Modell verwendet:

$$\Delta XCO_2 = a_0 + a_1 \cdot t + a_2 \cdot \sin(2\pi \cdot t) + a_3 \cdot \cos(2\pi \cdot t) + \varepsilon$$
(3)

Dadurch ist das Modell in allen Parametern linear und bietet somit robustere Ergebnisse.

Nach Parthier (2014) verhält sich die stochastische Unsicherheit σ_n bei Mittlung von *n* statistisch unabhängigen Werten folgendermaßen:

$$\sigma_{\rm n} = \frac{\sigma_0}{\sqrt{n}} \tag{4}$$

unter der Voraussetzung, dass die Unsicherheit der ungemittelten Werte σ_0 für alle Werte konstant ist.

TCCON-Station	Längengrad [°]	Breitengrad [°]	Höhe [km]
Bialystok (Polen)	23.03	53.23	0.18
Bremen (Deutschland)	8.85	53.10	0.04
Darwin (Australien)	130.89	-12.42	0.03
Garmisch-P. (Deutschland)	11.06	47.47	0.74
Karlsruhe (Deutschland)	8.44	49.10	0.11
Lamont (USA)	-97.49	36.60	0.32
Lauder (Neuseeland)	169.68	-45.04	0.37
Orleans (Frankreich)	2.11	47.97	0.13
Park Falls (USA)	-90.27	45.95	0.44
Sodankylä (Finnland)	26.63	67.37	0.18
Wollongong (Australien)	150.88	-34.40	0.03
Anmeyondo (Südkorea)	126.33	36.54	0.03
Ascension Island (St. Helena)	-14.33	-7.92	0.01
Pasadena (USA)	-118.13	34.13	0.21
Edwards (USA)	-117.88	34.96	0.70
Paris (Frankreich)	2.36	48.85	0.06
Reunion Island (Frankreich)	55.49	-20.90	0.09
Rikubetsu (Japan)	143.77	43.46	0.36
Saga (Japan)	130.29	33.24	0.01
Tsukuba (Japan)	140.12	36.05	0.03
East Trout Lake (Kanada)	-104.99	54.35	0.50
Burgos (Philippinen)	120.65	18.53	0.04

Tabelle 4.1: Für die Validation verwendete TCCON-Stationen mit Höhe, Längen- und Breitengrad

5. Ergebnisse

Die im folgenden Abschnitt dargestellten Validationsergebnisse beschränken sich auf exemplarische Stationen der Nord- und Südhemisphäre (NH: Lamont (USA) und in Teilen Edwards (USA), SH: Darwin (Australien) und in Teilen Lauder (Neuseeland)). Die dargestellten Gesamtergebnisse setzen sich dahingegen aus den Validationsergebnissen von allen verwendeten TCCON-Stationen zusammen. Detaillierte Darstellungen der Ergebnisse für alle Stationen sind dem Anhang beigefügt (Abbildung A.1 bis A.9, Tabelle A.1).

5.1. Validationsergebnisse der Einzelmessungen und Vergleich mit früheren Ergebnissen



Abbildung 5.1: XCO₂-Messungen des OCO-2 FOCAL (rot) mit kolokalisierten TCCON-Messungen (schwarz) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020

Die Kollokationen wurden nach der in Abschnitt 4 beschriebenen Methode validiert. Abbildung 5.1 zeigt für Lamont (USA) und Darwin (Australien) die XCO₂-Messungen von FOCAL und TCCON, die über den Validationszeitraum erhoben wurden. Es sind ein linearer Anstieg sowie jahreszeitlichen Schwankungen zu erkennen. Außerdem wird deutlich, dass die saisonalen Fluktuationen in Lamont (NH) stärker ausgeprägt sind als in Darwin (SH).



Abbildung 5.2: Differenz ΔXCO₂ zwischen den FOCAL- und TCCON-Messungen und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für die Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien)

Für jede TCCON-Station wurde die Abweichung zwischen den Satelliten- und Bodenmessungen mit Modell 3 approximiert und anschließend der regionale Fehler Δ_{reg} , der lineare Anstieg Δ_{dri} , die jahreszeitliche Abweichung Δ_{sea} , der räumlich-zeitliche Fehler Δ_{spt} und die Messunsicherheit σ_{FOCAL} des Satellitenproduktes bestimmt. In Abbildung 5.2 wird die FOCAL-TCCON-Abweichung sowie die zugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 exemplarisch für Lamont und Darwin gezeigt. Es sind für beide Stationen ein regionaler Fehler, linearer Drift und saisonale Schwankungen zu erkennen. Die vom Fitmodell erfasste jahreszeitliche Schwankung ist jedoch klein im Vergleich zur Streuung der Werte um die Null. Somit ist in der Abbildung erkennbar, dass ein wesentlicher Anteil der FOCAL-TCCON-Abweichung durch einen stochastischen Fehler zustande kommt.

Der regionale Fehler Δ_{reg} ergibt sich aus der durchschnittlichen Differenz ΔXCO_2 zwischen den FOCAL- und TCCON-Messungen. Nach dem verwendeten Fehlermodell entspricht der lineare Anstieg Δ_{dri} dem Parameter a_1 . Die jahreszeitliche Abweichung Δ_{sea} wurde aus der Standardabweichung des Sinus- und Kosinusterms $a_2 \cdot \sin(2\pi t) + a_3 \cdot \cos(2\pi t)$ bestimmt. Die Messunsicherheit σ_{FOCAL} wurde aus der Standardabweichung des Residuums ϵ ermittelt. Des Weiteren wurde der räumlich-zeitliche Fehler Δ_{spt} bestimmt. Dieser stellt die Kombination des regionalen Fehlers und der saisonalen Abweichung dar und berechnet sich aus der Quadratwurzel der Summe beider quadrierten Fehler. In Tabelle 5.1 wurden die Validationsergebnisse für Lamont (USA), Edwards (USA), Darwin (Australien) und Lauder (Neuseeland) sowie das Gesamtergebnis dargestellt.

Tabelle 5.1: Anzahl der Kollokationen n_{col} und Tagen, für die Messergebnisse vorliegen, n_{Tage} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jahreszeitliche Abweichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} , räumlich-zeitlicher Fehler Δ_{spt} und ermittelte Messunsicherheit σ_{FOCAL} für Darwin (Australien), Edwards (USA), Lauder (Neuseeland), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis

TCCON Station	n _{col}	n _{Tage}	$\Delta_{ m reg}$ [ppm]	Δ_{sea} [ppm]	$\Delta_{\rm spt}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	σ _{FOCAL} [ppm]
Darwin	85102	164	-0.27	0.26	0.37	-0.31	1.36
Edwards	99444	195	-0.29	0.34	0.45	-0.14	1.58
Lauder	10428	48	-0.56	0.77	0.95	0.30	1.89
Lamont	97119	262	-0.26	0.28	0.38	-0.06	1.63
Gesamt	768546	2641	0.56	0.35	0.66	0.03 ± 0.25	1.48

Insgesamt wurden 768546 Kollokationen an 22 TCCON-Stationen validiert. Es ergab sich eine Messunsicherheit von $\sigma_{FOCAL} = 1,48$ ppm, welche aus der Wurzel der mittleren quadratischen Unsicherheit aller Stationen bestimmt wurde. Der regionale Fehler ergibt sich aus der Standardabweichung der regionalen

Abweichungen an den einzelnen Stationen und liegt bei $\Delta_{\text{reg}} = 0,56 \text{ ppm}$. Es ergibt sich eine mittlere jahreszeitliche Schwankungen von $\Delta_{\text{sea}} = 0,35 \text{ ppm}$. Es wurde ein mittlerer lineare Anstieg von $\Delta_{\text{dri}} = (0,03 \pm 0,25) \text{ ppm/a}$ bestimmt. Der Fehler des linearen Anstiegs ergibt sich aus der Standardabweichung des regionalen Anstiegs. Des Weiteren wurde ein räumlich-zeitlicher Fehler von $\Delta_{\text{spt}} = 0,66 \text{ ppm}$ analog zu der Berechnung für einzelne Stationen aus dem regionalen und saisonalen Fehler ermittelt.

Ergebnisse n_{Tage} $\Delta_{\rm reg}$ Δ_{sea} $\Delta_{\rm spt}$ $\Delta_{\rm dri}$ $n_{\rm col}$ $\sigma_{\rm FOCAL}$ [ppm] [ppm] [ppm] [ppm/a] [ppm] 0.35 0.66 0.03 ± 0.25 1.48 eigene 768546 2641 0.56 Reuter (2021) 600174 2369 0.03 ± 0.26 0.57 0.37 0.68 1.48

Tabelle 5.2: Gesamtergebnisse der Validation nach Reuter (2021) und eigene Validationsergebnisse

In Tabelle 5.2 werden die in dieser Arbeit ermittelten Validationsergebnisse und die von Reuter (2021) veröffentlichten Ergebnisse dargestellt. In dem Bericht werden Kollokationen im Zeitraum Januar 2015 bis einschließlich Dezember 2019 validiert. Demnach unterscheiden sich die Anzahl an Kollokationen und Tage voneinander. Es lassen sich keine wesentlichen Unterschiede zwischen den Ergebnissen feststellen. Somit konnten für die OCO-2 FOCAL-Messungen die Validationsergebnisse reproduziert werden. Die Python-Implementierung wurde somit validiert.

5.2. Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die Validationsergebnisse

Die in Abschnitt 3.1 erzeugten Datensätze an Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der Einzelmessungen und Monatsmittelwerte der Tagesmittelwerte wurden analog zu den Einzelmessungen in Abschnitt 5.1 validiert. Für jede TCCON-Station wurden der regionale Fehler Δ_{reg} , der lineare Anstieg Δ_{dri} , die jahreszeitliche Schwankung Δ_{sea} , der räumlich-zeitliche Fehler Δ_{spt} und die FOCAL-Messunsicherheit σ_{FOCAL} bestimmt. In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der zeitlich gemittelten Einzelmessungen im Vergleich zu den ungemittelten Einzelmessungen sowie die monatlich gemittelten Tagesmittelwerte im Vergleich zu den Monatsmittelwerten der Einzelmessungen dargestellt.

5.2.1. Validationsergebnisse für verschiedene zeitliche Mittlungen auf Basis von Einzelmessungen



Abbildung 5.3: Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der XCO₂-FOCAL-Messungen in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020

Abbildung 5.3 zeigt die XCO₂-Einzelmessungen von OCO-2-FOCAL sowie die Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der Einzelmessungen. Für jede Mittlung sind weiterhin ein regionaler Fehler, zeitlich linearer Anstieg und jahreszeitliche Schwankungen zu erkennen. Des Weiteren zeigt die Abbildung eine abnehmende Streuung der Messwerte bei Vergrößerung des Mittlungsintervalls. Damit kann eine größere Messunsicherheit der ungemittelten Satellitenmessungen im Kontrast zu den monatlich gemittelten Messungen festgestellt werden. In Abbildung 5.4 wurden analog die verschieden gemittelten Einzelmessungen der TCCON-Stationen in Lamont und Darwin dargestellt. Ein regionaler Fehler, linearer Anstieg und jahreszeitliche Schwankungen der XCO₂-Messungen sind ebenfalls erkennbar.



Abbildung 5.4: Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der XCO₂-Messungen der TCCON-Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung 5.5: Relative Häufigkeit der OCO-2 FOCAL und TCCON-Differenz mit zugehöriger Gaußschen Normalverteilung (oben) und Vergleich der XCO₂-FOCAL- und TCCON-Messungen mit orthogonaler linearer Regression und Darstellung des 1:1-Verhältnisses (unten) für verschiedene zeitliche Mittlungen der Einzelmessungen unter Verwendung aller Stationen

In Abbildung 5.5 werden die relativen Häufigkeiten der FOCAL-TCCON-Differenz für die Einzelmessungen, Tages- Wochen und Monatsmittelwerte durch Histogramme dargestellt. Aus der empirischen Verteilung wurden Mittelwert μ und Standardabweichung σ bestimmt und die dazugehörige Funktion der Gaußschen Normalverteilung aufgetragen. Dabei ist zu erkennen, dass die Verteilung von Δ XCO₂ mit der erwarteten Normalverteilung übereinstimmen. Der bestimmte Mittelwert liegt zwischen –0,22 ppm und –0,38 ppm und zeigt hinsichtlich der zeitlichen Mittlung keine wesentlichen Abweichungen. Dazu ist die Abweichung der Mittelwerte von der Null klein gegenüber der Breite der Verteilung. Eine Verteilung um die Null ist für alle Datensätze zu erkennen. Die Standardabweichung beträgt für die Einzelmessungen 1,69 ppm und fällt im Zusammenhang mit der Mittlung auf einen Wert von 1,18 ppm ab. Die Abnahme der Streuung entspricht ebenfalls den Beobachtungen zu Abbildung 5.3. Des Weiteren wurden in Abbildung 5.5 für jeden Datensatz die FOCALgegen die TCCON-Messungen aufgetragen. Zusätzlich wurde eine orthogonale lineare Regression (ODR) durchgeführt, eine lineare Funktion der Form $f(x) = a \cdot x + b$ mit a = 1 und b = 0 abgebildet und der Korrelationskoeffizient δ zwischen den Messungen bestimmt. Die eingezeichnete Gerade entspricht dem 1:1-Verhältnis beider Größen, also einer vollständigen Übereinstimmung der FOCAL- und TCCON-Messungen. Analog zu den Histogrammen ist eine Streuung der Messungen um die 1:1-Gerade festzustellen, welche jedoch bei Vergrößerung des Mittlungsintervalls abnimmt. Ersichtlich wird dies ebenfalls durch den zunehmenden Korrelationskoeffizienten. Der bestehende lineare Zusammenhang kann durch die ODR ermittelt werden. Die bestimmten Steigungen der Regressionsgeraden liegen zwischen 0,95 und 0,99.



Abbildung 5.6: Differenz ΔXCO₂ zwischen den FOCAL- und TCCON-Messungen für verschiedene Mittlungen und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für die Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien)

Die Abweichung zwischen den OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen wurde ebenfalls mit Modell 3 approximiert. Abbildung 5.6 zeigt die Abweichung Δ XCO₂ sowie die zugehörigen Fit-Funktionen für die verschiedenen gemittelten Datensätze an den Stationen in Lamont und Darwin. Es sind ebenfalls regionale Abweichungen, ein linearer Drift und jahreszeitlichen Schwankungen zu erkennen. Außerdem wird deutlich, dass die Fit-Funktionen für die verschiedenen Datensätze übereinstimmen. Daraus lässt sich schließen, dass die zeitliche Mittlung keinen wesentlichen Einfluss auf das Resultat der Approximation mit Modell 3 hat.

Tabelle 5.3: Anzahl an Kollokationen n_{col} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jahreszeitliche Abweichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} und ermittelte Messunsicherheit σ_{FOCAL} für Darwin (Australien), Edwards (USA), Lauder (Neuseeland), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis für Einzelmessungen und Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der Einzelmessungen

TCCON Station	Mittlung	$n_{\rm col}$	$\Delta_{\rm reg}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	Δ _{sea} [ppm	Δ _{spt}] [ppm]	σ _{FOCAL} [ppm]
Lamont	keine	97119	-0.26	-0.06	0.28	0.38	1.63
	täglich	229	-0.23	-0.14	0.35	0.42	1.48
	wöchentlich	143	-0.35	-0.11	0.41	0.54	1.27
	monatlich	48	-0.35	-0.11	0.36	0.50	0.71
Darwin	keine	85102	-0.27	-0.31	0.26	0.37	1.36
	täglich	149	-0.13	-0.30	0.20	0.24	1.08
	wöchentlich	83	-0.17	-0.33	0.22	0.28	0.89
	monatlich	32	-0.23	-0.34	0.20	0.30	0.67
Edwards	keine	99444	-0.29	-0.14	0.34	0.45	1.58
	täglich	183	-0.09	-0.15	0.46	0.46	1.42
	wöchentlich	119	-0.19	-0.13	0.44	0.48	1.18
	monatlich	44	-0.35	-0.13	0.56	0.66	0.74
Lauder	keine	10428	-0.56	0.30	0.77	0.95	1.89
	täglich	30	-0.24	0.01	0.30	0.38	0.88
	wöchentlich	24	-0.29	-0.04	0.28	0.40	0.90
	monatlich	18	-0.40	-0.18	0.25	0.47	0.85
Gesamt	keine	768546	0.56	0.03 ± 0.25	0.35	0.66	1.48
	täglich	2169	0.51	0.01 ± 0.28	0.34	0.62	1.28
	wöchentlich	1395	0.55	0.02 ± 0.34	0.38	0.67	1.15
	monatlich	622	0.60	0.05 ± 0.34	0.34	0.69	0.80

In Tabelle 5.3 werden die Validationsergebnisse für verschiedene Mittlungen der Einzelmessungen in Lamont, Darwin, Edwards und Lauder sowie das Gesamtergebnis zusammengefasst. Insgesamt wurden 2169 Tages-, 1395 Wochen- und 622 Monatsmittelwerte der Einzelmessungen validiert. Es ergibt sich eine regionale Abweichung zwischen 0,51 ppm und 0,60 ppm, ein linearer Anstieg zwischen 0,01 ppm/a und 0,05 ppm/a, eine jahreszeitliche Abweichung von 0,34 ppm bis 0,38 ppm sowie ein räumlich-zeitlicher Fehler von 0,62 ppm bis 0,69 ppm. Unter Verwendung der TCCON-Netzwerkunsicherheit $\Delta_{\text{TCCON}} = \pm 0.4 \text{ ppm}$ als Referenz, kann keine wesentliche Abweichung zwischen den Ergebnissen der Einzelmessungen und den zeitlichen Mittelwerten festgestellt werden. Für die dargestellten Stationen ist ebenfalls mehrheitlich kein wesentlicher Einfluss der zeitlichen Mittlung auf die systematischen Komponenten innerhalb der TCCON-Messunsicherheit zu erkennen. Eine Ausnahme stellt allerdings die saisonale Schwankung in Lauder dar. Diese beträgt für die Einzelmessungen 0,77 ppm und liegt für die zeitlich gemittelten Daten zwischen 0,25 ppm und 0,30 ppm. Die Abweichung ist daher größer als die angegebene TCCON-Messunsicherheit. Weiterhin sind wesentliche Abweichungen in den linearen Drifts Δ_{dri} zu erkennen. Dabei ist zu erwähnen, dass die Abweichungen innerhalb der gemittelten Werte gemäß der TCCON-Messunsicherheit keine signifikanten Unterschiede aufweisen und die wesentlichen Abweichungen lediglich zwischen den Einzelmessungen und Mittelwerten bestehen. Zudem wurden in Lauder 30 Kollokationen der Tagesmittelwerte ausgewertet, welche innerhalb des Validationszeitraumes erhoben wurden. Aus Abbildung A.2 wird ebenso deutlich, dass die Satellitenmessungen überwiegend in den Sommermonaten der Südhemisphäre erfolgten. Die geringe Anzahl an Kollokationen der Mittelwerte verbunden mit der Unregelmäßigkeit der Messungen könnten bewirken, dass die jahreszeitlichen Schwankungen und der lineare Drift in Lauder durch Modell 3 nicht ausreichend erfasst werden. Die Abweichungen der Fit-Funktionen sind in Abbildung A.4 zu erkennen. Die Beobachtungen lassen sich ebenfallls bei den Stationen in Anmeyondo und Rikubetsu machen (vgl. Abbildung A.2, A.4, Tabelle A.1). Daraus resultierend sind Abweichungen zwischen den räumlich-zeitlichen Fehlern zu erkennen. An der Station in Saga lässt sich eine Abweichung des regionalen Fehlers außerhalb der TCCON-Unsicherheit feststellen (vgl. Tabelle A.1). Aus Abbildung A.4 wird

deutlich, dass die FOCAL-TCCON-Differenz ΔXCO_2 für Tages- und Wochenmittelwerte um einen größeren Wert im Vergleich zu den Einzelmessungen und Monatsmittelwerten streuen. Dies könnte auf die gewählte Mindestanzahl an Einzelmessungen pro Mittlungsintervall zurückzuführen sein. Somit bestehen für die Bildung von Monatsmittelwerten ausreichend Einzelmessungen mit Abweichungen $\Delta XCO_2 < -3$ ppm, allerdings nicht ausreichend Messungen für die Berechnung von Tages- oder Wochenmittelwerten. Folglich lassen sich Unterschiede in den räumlich-zeitlichen Fehlern feststellen.

Des Weiteren ist für alle Stationen und im Gesamtergebnis eine Abnahme der Messunsicherheit im Zusammenhang mit der Größe des Mittlungszeitraums zu erkennen. Das Gesamtergebnis zeigt eine Unsicherheit von 1,48 ppm für die Einzelmessungen, 1,28 ppm für die Tagesmittelwerte, 1,15 ppm für die Wochenmittelwerte und 0,80 ppm für die Monatsmittelwerte. In Abbildung 5.7 sind die Validationsergebnisse aus Tabelle 5.3 und die geschätzte Unsicherheit von FOCAL σ_{rep} dargestellt. Die Abbildung visualisiert die mehrheitliche Übereinstimmung der systematischen Fehlerkomponenten hinsichtlich der zeitlichen Mittlung innerhalb der TCCON-Unsicherheit. Die Abnahme der empirisch bestimmten FOCAL-Messunsicherheit σ_{FOCAL} wird ebenfalls verdeutlicht, welche allerdings im Vergleich zur erwarteten Unsicherheit σ_{rep} geringer ist. Da die Berechnung der erwarteten Unsicherheit auf der Annahme von unkorrelierten Messungen beruht, lässt sich aus der größeren Unsicherheit σ_{FOCAL} gegenüber σ_{rep} schlussfolgern, dass zeitliche Korrelationen zwischen den Messungen bestehen.



Abbildung 5.7: Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an Kollokationen und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der Einzelmessungen und Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der Einzelmessungen für Lauder (Neuseeland), Darwin (Australien), Edwards (USA), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis



5.2.2. Validationsergebnisse für Monatsmittelwerte auf Basis von Tagesmittelwerte

Abbildung 5.8: Einzelmessungen und monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte der XCO₂-Messungen von OCO-2 FO-CAL in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020

Abbildung 5.8 zeigt die Einzelmessungen, Monatsmittelwerte aus den Einzelmessungen und aus den Tagesmittelwerten von OCO-2-FOCAL für Lamont und Darwin. Es sind ebenfalls regionale Abweichungen, ein linearer Drift sowie jahreszeitliche Schwankungen zu erkennen. Des Weiteren zeigt die Abbildung eine Abnahme der Messunsicherheit in den monatlich gemittelten Einzel- und Tagesmittelwerten. In Abbildung 5.9 sind die ungemittelten und monatliche gemittelten Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Tagesmittelwerte der TCCON-Messungen für Lamont und Darwin dargestellt. Analog lassen sich regionale Abweichungen, lineare Anstiege und jahreszeitliche Fluktuationen erkennen.



Abbildung 5.9: Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte der XCO₂-Messungen der TCCON-Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung 5.10: FOCAL-TCCON-Differenz ΔXCO₂ für monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte mit dazugehörigen Fit-Funktionen nach Modell 3 für die Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien)

In Abbildung 5.10 sind die FOCAL-TCCON-Abweichungen für die beiden Datensätze der Monatsmittelwerte sowie die dazugehörigen Fit-Funktionen an den Stationen in Lamont (USA) und Darwin (Australien) dargestellt. Dabei sind regionale Fehler, lineare Drifts und saisonale Schwankungen zu erkennen. An der Station in Lamont lässt sich eine Abweichung der Fit-Funktionen erkennen. Unter Berücksichtigung der TCCON-Netzwerkunsicherheit kann diese allerdings vernachlässigt werden. Die Kollokationen wurden analog zu den vorherigen Datensätzen validiert. Die Validationsergebnisse der monatlich gemittelten Einzelmessungen (EM) und Tagesmittelwerte (TM) werden in Tabelle 5.4 dargestellt. Für die dargestellten Stationen und im Gesamtergebnis stimmen die regionalen Fehler, linearen Drifts, jahreszeitlichen Schwankungen und räumlich-zeitlichen Fehler der Datensätze gemäß der TCCON-Unsicherheit überein. Für die Messunsicherheit σ_{FOCAL} lassen sich ebenfalls keine erheblichen Abweichungen feststellen. Damit kann sowohl die Stabilität der Mittelwerte als auch die der Validationsergebnisse gezeigt werden. Allerdings sind wesentliche Unterschiede in dem linearen Drift und der FOCAL-Unsicherheit für die Station in Rikubetsu zu erkennen (vgl. Tabelle A.1). Dies könnte ebenfalls aus der in Abschnitt 5.2.1 diskutierten Anzahl an zeitlichen Mittelwerten resultieren.

	sunsicherheit σ_{FOCAL} für Darwin (Australien), Edwards (USA), Lau der (Neuseeland), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis für Mo natsmittelwerte der Einzelmessungen und Tagesmittelwerten							
TCCON Station	monatl. gem. Datensatz	n _{col}	$\Delta_{\rm reg}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	∆ _{sea} [ppm]	∆ _{spt} [ppm]	σ _{FOCAL} [ppm]	
Darwin	EM	32	-0.23	-0.34	0.20	0.30	0.67	
	TM	34	-0.13	-0.34	0.17	0.21	0.64	
Edwards	EM	44	-0.35	-0.13	0.56	0.66	0.74	

-0.14

-0.40

-0.23

-0.35

-0.30

0.60

0.55

0.57

0.25

0.20

0.36

0.47

0.34

0.38

-0.14

-0.18

-0.12

-0.11

-0.15

0.05

-0.01

0.58

0.47

0.31

0.50

0.55

0.69

0.67

0.83

0.85

0.71

0.71

0.85

0.80

0.90

45

18

20

48

52

622

677

TM

EM

TM

EM

TM

EM

ΤM

Lauder

Lamont

Gesamt

Tabelle 5.4: Anzahl an Kollokationen n_{col} , regionale Abweichung Δ_{reg} , jahreszeitliche Abweichung Δ_{sea} , linearer Anstieg Δ_{dri} und ermittelte Mes-

Die Validationsergebnisse aus Tabelle 5.4 und die theoretisch bestimmte FOCAL-Unsicherheit werden in Abbildung 5.11 graphisch dargestellt. In der Abbildung wird die Übereinstimmung der Ergebnisse visualisiert. Weiterhin wird deutlich, dass die empirisch bestimmte Unsicherheit σ_{FOCAL} größer als die erwartete $\sigma_{\rm rep}$ Unsicherheit ist. Dies ist konsistent mit den in Abbildung 5.7 gezeigten Ergebnissen. Außerdem zeigt Abbildung 5.11, dass die Unsicherheit σ_{FOCAL} im Gesamtergebnis der monatlich gemittelten Tagesmittelwerten größer als die der monatlich gemittelten Einzelmessungen. Dies ist nach den Gesetzmäßigkeiten der Fehlerfortpflanzung zu erwarten und deshalb auch für σ_{rep} sichtbar.



Abbildung 5.11: Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an Kollokationen und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der monatlich gemittelten Einzelmessungen und Tagesmittelwerten für Lauder (Neuseeland), Darwin (Australien), Edwards (USA), Lamont (USA) und das Gesamtergebnis

5.3. Statistische Unabhängigkeit für verschiedene Mittlungsintervalle

Für die Einzelmessungen sowie Tages-, Wochen und Monatsmittelwerte der Einzelmessungen wurde der Einfluss der Mittlung auf die Messunsicherheit σ_{FOCAL} exemplarisch für Lamont (USA) untersucht. Dazu wurden jeweils *n* Werte in den Residuen der Datensätze gemittelt und die Messunsicherheiten σ_{FOCAL} aus dessen Standardabweichung bestimmt. Nach Gleichung 4 ist durch die Mittlung von *n* statistisch unabhängigen Werten ein Abfall der Messunsicherheit um den Faktor $\frac{1}{\sqrt{n}}$ zu erwarten. In Abbildung 5.12 sind graphische Auftragungen der Messunsicherheiten σ_{FOCAL} gegen die Anzahl gemittelter Werte *n* in den Residuen für alle Datensätze dargestellt. Dazu wurde die aufgrund der Fehlerfortpflanzung für statistisch unabhängige Messungen erwartete Messunsicherheit σ_{rep} ebenfalls aufgetragen.



Abbildung 5.12: Messunsicherheiten σ_{FOCAL} gegen die Anzahl der gemittelten Werte *n* in den Residuen und theoretisch erwartete Messunsicherheiten für Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte in Lamont (USA)

Für die Einzelmessungen ist zu erkennen, dass sich die Messunsicherheit nicht den theoretischen Erwartungen entsprechend verringert. Der geringe Abfall lässt darauf schließen, dass zeitliche Korrelationen zwischen den XCO₂-Messungen bestehen und sich die Messunsicherheit neben einem stochastischen Anteil außerdem aus einer systematischen Komponente zusammensetzt, welche nicht durch die Validation erfasst wurde. Allerdings ist zu erwähnen, dass in Lamont teilweise bis zu 100 Satellitenmessungen innerhalb weniger Minuten erfolgten. Dies kann zeitliche Korrelationen zwischen den Messungen zur Folge haben, welche ein rein stochastisches Verhalten der Messunsicherheit ausschließen würden. Beispielsweise könnten unter bestimmten meteorologische Bedingungen Abweichungen der Satellitenmessungen zu den TCCON-Messungen erzeugt werden, welche als systematische Komponente zu interpretieren sind. Unter der Berücksichtigung, dass keine Veränderung der meteorologischen Situation an einer Station innerhalb dieses Messzeitraums stattfindet, bestehen zeitliche Korrelationen zwischen den Messungen.

Die Messunsicherheiten der Tagesmittelwerte verhalten sich bei Mittlung der Residuen gemäß den theoretischen Erwartungen. Bei der Messunsicherheit handelt es sich somit um einen rein stochastischen Fehler. Es liegt also nahe dass für diesen Datensatz in Lamont alle wesentlichen systematischen Komponenten durch die Validation erfasst wurden.

Für die Wochen- und Monatsmittelwerte ist zu erkennen, dass die bestimmte Messunsicherheit ab ungefähr n = 3 unterhalb der erwarteten Unsicherheit liegt. Eine mögliche Ursache ist das unvollständige Erfassen der jahreszeitlichen Abweichung durch Modell 3. Somit wären im stochastischen Anteil saisonale Schwankungen enthalten, welche zu zeitlichen Antikorrelationen der Messungen in einem geschätzten Intervall von 3 bis 6 Monaten führen. Für die Betrachtung von Einzelmessungen oder Tagesmittelwerten könnten diese unbemerkt bleiben, sich jedoch in der Messunsicherheit für Wochen- oder Monatsmittelwerte erkennen lassen.

6. Fazit

Zu Beginn wurden die ungemittelten OCO-2 FOCAL- mit TCCON-Messungen validiert. Die Ergebnisse stimmen mit den Validationsergebnissen der zitierten Veröffentlichung überein. Die Python-Implementierung konnte somit validiert werden. Aus den Einzelmessungen wurden vier Datensätze, bestehend aus täglich, wöchentlich und monatlich gemittelten Einzelmessungen sowie monatlich gemittelten Tagesmittelwerten, erzeugt und ebenfalls validiert. Im Vergleich der Satelliten- und TCCON-Messungen wurde graphisch eine Abnahme der Streuung im Zusammenhang mit der zeitlichen Mittlung festgestellt. Die durchschnittliche FOCAL-TCCON-Differenz wies keine wesentlichen Unterschiede hinsichtlich der Mittlung auf. In den Validationsergebnissen wurde insgesamt kein wesentlicher Einfluss auf die systematischen Komponenten festgestellt. Die empirisch bestimmte Messunsicherheit beträgt 1,48 ppm für die Einzelmessungen, 1,28 ppm für die Tages- 1,15 ppm für die Wochen- und 0,80 ppm für die Monatsmittelwerte. Für alle Stationen sowie im Gesamtergebnis konnte eine Abnahme der Messunsicherheit hinsichtlich der zeitlichen Mittlung beobachtet werden. Diese ist jedoch weniger stark ausgeprägt als man unter der Annahme statistischer Unabhängigkeit hätte erwarten können. Die Validationsergebnisse der monatlich gemittelten Tagesmittelwerte zeigen insgesamt keine wesentlichen Abweichungen zu den Ergebnissen der monatlich gemittelten Einzelmessungen, wodurch die Robustheit der Validationsmethode hinsichtlich der gewählten Mittlungsmethode gezeigt wird. Für alle gemittelten Datensätze ist die ermittelte FOCAL-Unsicherheit größer als die theoretisch erwartete. Anschließend wurde exemplarisch für Lamont der Einfluss der Mittlung auf die Messunsicherheit graphisch untersucht. Für die Tagesmittelwerte entspricht die Abnahme der FOCAL-Unsicherheit bei Vergrößerung des Mittlungsintervalls den theoretisch ermittelten Werten. Die Abnahme der Unsicherheit bei zunehmender Anzahl an gemittelten Werte ist für die Einzelmessungen kleiner als die theoretisch bestimmte. Dies wurde auf zeitliche Korrelationen zwischen den Messungen zurückgeführt. Die FOCAL-Unsicherheit der Wochen- und Monatsmittelwerte wies eine stärkere Abnahme bei Mittlung als erwartet auf.

Literatur

- Canadell, J., Monteiro, P., Costa, M., da Cunha, L. C., P.M. Cox, A. E., Henson, S., Ishii, M., Jaccard, S., Koven, C., Lohila, A., Patra, P., S. Piao, J. R., Syampungani, S., Zaehle, S., and Zickfeld, K. (2021). Global carbon and other biogeochemical cycles and feedbacks. *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press. In Press.
- Crisp, D., Pollock, H. R., Rosenberg, R., Chapsky, L., Lee, R. A. M., Oyafuso, F. A., Frankenberg, C., O'Dell, C. W., Bruegge, C. J., Doran, G. B., Eldering, A., Fisher, B. M., Fu, D., Gunson, M. R., Mandrake, L., Osterman, G. B., Schwandner, F. M., Sun, K., Taylor, T. E., Wennberg, P. O., and Wunch, D. (2017). The on-orbit performance of the Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) instrument and its radiometrically calibrated products. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(1):59–81. verfügbar unter: https://amt.copernicus. org/articles/10/59/2017/, doi: 10.5194/amt-10-59-2017.
- Gulev, S., Thorne, P., Ahn, J., Dentener, F., Domingues, C., Gerland, S., Gong, D., Kaufman, D., Nnamchi, H., Quaas, J., Rivera, J., Sathyendranath, S., Smith, S., Trewin, B., von Schuckmann, K., and Vose, R. (2021). Changing State of the Climate System. *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press. In Press.
- Noël, S., Reuter, M., Buchwitz, M., Borchardt, J., Hilker, M., Bovensmann, H., Burrows, J. P., Di Noia, A., Suto, H., Yoshida, Y., Buschmann, M., Deutscher, N. M., Feist, D. G., Griffith, D. W. T., Hase, F., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Ohyama, H., Petri, C., Podolske, J. R., Pollard, D. F., Sha, M. K., Shiomi, K., Sussmann, R., Té, Y., Velazco, V. A., and Warneke, T. (2021). XCO₂ retrieval for GOSAT and GOSAT-2 based on the FOCAL algorithm. *Atmospheric Measurement Techniques*, 14(5):3837–3869. verfügbar unter: https://amt.copernicus.org/articles/14/3837/2021/,

doi: 10.5194/amt-14-3837-2021.

- Parthier, R. (2014). Messtechnik. Grundlagen und Anwendungen der elektrischen Messtechnik. 7. Auflage. Springer Vieweg.
- Reuter, M. (2021). End-to-End ECV Uncertainty Budget Version 2 (E3UBv2) - FOCAL OCO-2. Technical report, ESA Climate Change Initiative "Plus" (CCI+), verfügbar unter: https://www.iup.uni-bremen.de/carbon_ ghg/docs/GHG-CCIplus/CRDP6/E3UBv2_GHG-CCI_C02_0C2_F0CA_v09_ 20210126.pdf. letzter Zugriff: 23.11.2021.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Hilker, M., Heymann, J., Schneising, O., Pillai, D., Bovensmann, H., Burrows, J. P., Bösch, H., Parker, R., Butz, A., Hasekamp, O., O'Dell, C. W., Yoshida, Y., Gerbig, C., Nehrkorn, T., Deutscher, N. M., Warneke, T., Notholt, J., Hase, F., Kivi, R., Sussmann, R., Machida, T., Matsueda, H., and Sawa, Y. (2014). Satellite-inferred european carbon sink larger than expected. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(24):13739–13753. verfügbar unter: https://acp.copernicus.org/articles/14/13739/2014/, doi: 10.5194/acp-14-13739-2014.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Bovensmann, H., and Burrows, J. (2021). ESA Greenhouse Gases Climate Change Initiative (GHG-CCI): Column averaged carbon dioxide from OCO-2 generated with the FOCAL algorithm, version 09. NERC EDS Centre for Environmental Data Analysis. doi:10.5285/b0de069568a141b0b074ca0f7cee004b.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Bovensmann, H., and Burrows, J. P. (2020). Algorithm Theoretical Basis Document Version 2 (ATBDv2) -Retrieval of XCO2 from the OCO-2 satellite using the Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval (FOCAL). Technical report, ESA Climate Change Initiative "Plus" (CCI+) for the Essential Climate Variable (ECV), verfügbar unter: https://www.iup.uni-bremen.de/carbon_ghg/docs/GHG-CCIplus/ CRDP6/ATBD_C02_0C2_FOCA_v2.pdf. letzter Zugriff: 27.11.2021.

- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., S.Noël, Bovensmann, H., and Burrows, J. (2017a). A Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval for Hyperspectral Instruments Approximating Multiple Scattering Part 2: Application to XCO2 Retrievals from OCO-2, Remote Sensing, 9(11), 1102. doi:10.3390/rs9111102.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., S.Noël, V.Rozanov, Bovensmann, H., and Burrows, J. (2017b). A Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval for Hyperspectral Instruments Approximating Multiple Scattering - Part 1: Radiative Transfer and a Potential OCO-2 XCO₂ Retrieval Setup, Remote Sensing, 9(11), 1159. doi:10.3390/rs9111159.
- Reuter, M., Buchwitz, M., and Schneising-Weigel, O. (2019). Product Quality Assessment Report (PQAR) – ANNEX D for products XCO2_EMMA, XCH4_EMMA, XCO2_OBS4MIPS, XCH4_OBS4MIPS (v4.1, 2003-2018). Technical report, Copernicus Climate Change Service (C3S), verfügbar unter: http://www.iup.uni-bremen.de/carbon_ghg/docs/C3S/CDR3_ 2003-2018/PQAR/C3S_D312b_Lot2.2.3.2-v1.0_PQAR-GHG_ANNEX-D_v3.1. pdf. letzter Zugriff: 06.11.2021.
- Wunch, D., Toon, G. C., Blavier, J.-F. L., Washenfelder, R. A., Notholt, J., Connor,
 B. J., Griffith, D. W. T., Sherlock, V., and Wennberg, P. O. (2011). The Total Carbon Column Observing Network. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 369*, pages 2087–2112. verfügbar unter: https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2010.0240, doi: 10.1098/rsta.2010.0240.
- Wunch, D., Toon, G. C., Wennberg, P. O., Wofsy, S. C., Stephens, B. B., Fischer, M. L., Uchino, O., Abshire, J. B., Bernath, P., Biraud, S. C., Blavier, J.-F. L., Boone, C., Bowman, K. P., Browell, E. V., Campos, T., Connor, B. J., Daube, B. C., Deutscher, N. M., Diao, M., Elkins, J. W., Gerbig, C., Gottlieb, E., Griffith, D. W. T., Hurst, D. F., Jiménez, R., Keppel-Aleks, G., Kort, E. A., Macatangay, R., Machida, T., Matsueda, H., Moore, F., Morino, I., Park, S., Robinson, J., Roehl, C. M., Sawa, Y., Sherlock, V., Sweeney, C., Tanaka, T., and Zondlo, M. A. (2010). Calibration of the Total Carbon Column Observing Network

using aircraft profile data. *Atmospheric Measurement Techniques*, 3(5):1351–1362. verfügbar unter: https://amt.copernicus.org/articles/3/1351/2010/, doi: 10.5194/amt-3-1351-2010.

Wunch, D., Wennberg, P. O., Osterman, G., Fisher, B., Naylor, B., Roehl, C. M., O'Dell, C., Mandrake, L., Viatte, C., Kiel, M., Griffith, D. W. T., Deutscher, N. M., Velazco, V. A., Notholt, J., Warneke, T., Petri, C., De Maziere, M., Sha, M. K., Sussmann, R., Rettinger, M., Pollard, D., Robinson, J., Morino, I., Uchino, O., Hase, F., Blumenstock, T., Feist, D. G., Arnold, S. G., Strong, K., Mendonca, J., Kivi, R., Heikkinen, P., Iraci, L., Podolske, J., Hillyard, P. W., Kawakami, S., Dubey, M. K., Parker, H. A., Sepulveda, E., García, O. E., Te, Y., Jeseck, P., Gunson, M. R., Crisp, D., and Eldering, A. (2017). Comparisons of the Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) X_{CO2} measurements with TCCON. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(6):2209–2238. verfügbar unter: https://amt.copernicus.org/articles/10/2209/2017/, doi: 10.5194/amt-10-2209-2017.

A. Anhang



Abbildung A.1: XCO₂-Messungen des OCO-2 FOCAL (rot) mit kolokalisierten TCCON-Messungen aller verwendeten TCCON-Stationen (schwarz) für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung A.2: Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der XCO₂-Messungen von OCO-2 FOCAL an allen verwendeten TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung A.3: Einzelmessungen, Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte der XCO₂-Messungen der verwendeten TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung A.4: Abweichung zwischen OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen Δ XCO₂ und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für verschiedene Mittlungen der Einzelmessungen an allen verwendeten TCCON-Stationen



Abbildung A.5: Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an Kollokationen n_{col} und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der Einzelmessungen und Tages-, Wochen- und Monatsmittelwerte für alle verwendeten Stationen und das Gesamtergebnis



Abbildung A.6: Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte der XCO₂-Messungen von OCO-2 FOCAL an allen verwendeten TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung A.7: Einzelmessungen sowie monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte der XCO₂-Messungen der verwendeten TCCON-Stationen für den Validationszeitraum 2015 bis 2020



Abbildung A.8: Abweichung zwischen OCO-2 FOCAL- und TCCON-Messungen Δ XCO₂ und dazugehörige Fit-Funktion nach Modell 3 für monatlich gemittelte Einzelmessungen und Tagesmittelwerte an allen verwendeten TCCON-Stationen



Abbildung A.9: Graphische Darstellung der Validationsergebnisse, Anzahl an Kollokationen n_{col} und erwartete Messunsicherheit σ_{rep} der monatlich gemittelten Einzelmessungen und Tagesmittelwerte für alle verwendeten Stationen und das Gesamtergebnis

TCCON	Mittlung	$n_{\rm col}$	$\Delta_{\rm reg}$	$\Delta_{ m dri}$	Δ_{sea}	$\Delta_{\rm spt}$	$\sigma_{\rm FOCAL}$
Station	C		[ppm]	[ppm/a]	[ppm] [ppm]	[ppm]
Ascension	keine	11490	0.29	0.16	0.19	0.35	1.13
Island	nemie	111/0	0.2	0.10	0.17	0.00	1110
	täglich	58	0.49	-0.03	0.08	0.49	1.00
	wöchentlich	44	0.45	0.01	0.15	0.48	0.90
	monatlich (EM)	20	0.45	0.09	0.07	0.46	0.83
	monatlich (TM)	20	0.50	0.07	0.13	0.52	0.70
Anevmond	o keine	3863	0.06	-0.16	0.29	0.29	1.46
	täglich	15	0.45	0.85	0.79	0.91	1.01
	wöchentlich	11	0.44	0.88	0.57	0.72	1.03
	monatlich (EM)	7	0.34	0.91	0.25	0.42	0.91
	monatlich (TM)	8	0.51	1.02	0.60	0.79	0.89
Bialvstok	keine	21642	0.11	0.13	0.15	0.19	1.42
	täglich	85	0.22	0.12	0.18	0.29	1.21
	wöchentlich	45	0.23	0.09	0.18	0.30	0.99
	monatlich (EM)	25	0.10	0.01	0.28	0.29	0.71
	monatlich (TM)	25	0.16	0.06	0.23	0.28	0.63
Bremen	keine	14119	-0.08	-0.21	0.62	0.62	1.56
	täglich	43	-0.10	-0.30	0.34	0.36	1.38
	wöchentlich	34	0.03	-0.45	0.48	0.48	1.13
	monatlich (EM)	22	-0.10	-0.32	0.42	0.43	1.19
	monatlich (TM)	23	-0.19	-0.29	0.32	0.37	1.28
Burgos	keine	12486	0.20	0.07	0.30	0.36	1.02
0	täglich	32	0.36	-0.28	0.23	0.43	0.82
	wöchentlich	25	0.35	-0.32	0.14	0.38	0.78
	monatlich (EM)	13	0.30	-0.12	0.40	0.50	0.59
	monatlich (TM)	15	0.31	-0.41	0.32	0.45	0.57
Pasadena	keine	86417	-1.79	-0.11	0.31	1.82	1.73
	täglich	253	-1.69	-0.04	0.33	1.72	1.86
	wöchentlich	152	-1.83	-0.09	0.49	1.90	1.54
	monatlich (EM)	58	-1.99	-0.09	0.44	2.04	1.02
	monatlich (TM)	59	-1.72	0.00	0.29	1.75	1.00
Darwin	keine	85102	-0.27	-0.31	0.26	0.37	1.36
	täglich	149	-0.13	-0.30	0.20	0.24	1.08
	wöchentlich	83	-0.17	-0.33	0.22	0.28	0.89
	monatlich (EM)	32	-0.23	-0.34	0.20	0.30	0.67
	monatlich (TM)	34	-0.13	-0.34	0.17	0.21	0.64

Tabelle A.1: Validationsergebnisse und Anzahl der Kollokationen n_{col} aller verwendeten TCCON-Stationen

TCCON Station	Mittlung	$n_{\rm col}$	$\Delta_{\rm reg}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	Δ _{sea} [ppm	Δ _{spt} 1] [ppm	σ _{FOCAL} ۱] [ppm]
Edwards	keine	99444	-0.29	-0.14	0.34	0.45	1.58
20110100	täglich	183	-0.09	-0.15	0.46	0.46	1.42
	wöchentlich	119	-0.19	-0.13	0.44	0.48	1.18
	monatlich (EM)	44	-0.35	-0.13	0.56	0.66	0.74
	monalich (TM)	45	-0.14	-0.14	0.57	0.58	0.83
East Trout Lake	keine	11339	0.37	0.12	0.34	0.50	1.49
	täglich	63	0.62	-0.14	0.50	0.80	1.25
	wöchentlich	33	0.63	-0.27	0.49	0.80	0.88
	monatlich (EM)	13	0.59	0.01	0.22	0.63	0.60
	monatlich (TM)	16	0.84	-0.42	0.58	1.02	0.71
Garmisch- P.	keine	3824	0.40	0.27	0.59	0.72	1.62
	täglich	47	0.34	0.21	0.73	0.80	1.11
	wöchentlich	32	0.38	0.21	0.67	0.77	1.15
	monatlich (EM)	18	0.41	0.24	0.54	0.68	0.51
	monatlich (TM)	24	0.21	0.25	0.66	0.69	0.91
Saga	keine	35481	-1.22	0.19	0.05	1.22	1.52
0	täglich	99	-0.78	0.20	0.24	0.81	1.43
	wöchentlich	75	-0.86	0.19	0.16	0.87	1.39
	monatlich (EM)	34	-1.22	0.13	0.31	1.26	1.19
	monatlich (TM)	42	-1.02	0.15	0.42	1.10	1.20
Karlsruhe	keine	34983	0.23	0.15	0.71	0.75	1.51
	täglich	123	0.22	0.19	0.49	0.54	1.70
	wöchentlich	77	0.18	0.18	0.77	0.79	1.82
	monatlich (EM)	32	0.17	0.17	0.53	0.56	0.70
	monatlich (TM)	32	0.04	0.27	0.70	0.71	1.45
Lauder	keine	10428	-0.56	0.30	0.77	0.95	1.89
	täglich	30	-0.24	0.01	0.30	0.38	0.88
	wöchentlich	24	-0.29	-0.04	0.28	0.40	0.90
	monatlich (EM)	18	-0.40	-0.18	0.25	0.47	0.85
	monatlich (TM)	20	-0.23	-0.12	0.20	0.31	0.71
Lamont	keine	97119	-0.26	-0.06	0.28	0.38	1.63
	täglich	229	-0.23	-0.14	0.35	0.42	1.48
	wöchentlich	143	-0.35	-0.11	0.41	0.54	1.27
	monatlich (EM)	48	-0.35	-0.11	0.36	0.50	0.71
	monatlich (TM)	52	-0.30	-0.15	0.47	0.55	0.85

TCCON Station	Mittlung	$n_{\rm col}$	$\Delta_{\rm reg}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	Δ _{sea} [ppm	Δ _{spt} 1] [ppm	σ _{FOCAL} 1] [ppm]
Orleans	keine	44387	0.31	-0.01	0.17	0.36	1.39
	täglich	127	0.56	0.02	0.16	0.58	1.22
	wöchentlich	74	0.40	0.05	0.20	0.45	0.96
	monatlich (EM)	30	0.47	0.05	0.29	0.55	0.67
	monatlich (TM)	32	0.51	-0.02	0.27	0.57	0.62
Park Falls	keine	41485	-0.20	0.07	0.39	0.44	1.39
	täglich	171	-0.24	0.08	0.31	0.39	1.30
	wöchentlich	99	-0.24	0.06	0.26	0.35	1.19
	monatlich (EM)	38	-0.34	0.13	0.18	0.38	0.69
	monatlich (TM)	39	-0.25	0.11	0.29	0.39	0.77
Paris	keine	31512	-0.88	0.05	0.36	0.95	1.57
	täglich	74	-0.57	0.12	0.46	0.73	1.74
	wöchentlich	44	-0.80	0.39	0.61	1.01	1.51
	monatlich (EM)	25	-0.84	0.26	0.42	0.94	0.95
	monatlich (TM)	29	-0.72	0.05	0.41	0.83	1.21
Reunion Island	keine	21101	0.67	-0.29	0.25	0.71	1.01
	täglich	71	0.53	-0.28	0.27	0.60	0.86
	wöchentlich	59	0.56	-0.25	0.36	0.66	0.79
	monatlich (EM)	29	0.61	-0.26	0.33	0.70	0.54
	monatlich (TM)	32	0.58	-0.23	0.33	0.67	0.63
Rikubetsu	keine	1400	0.29	0.83	0.49	0.56	1.65
	täglich	14	-0.09	0.61	0.20	0.22	1.05
	wöchentlich	9	-0.27	0.92	0.73	0.78	0.45
	monatlich (EM)	8	0.05	1.08	0.52	0.53	0.15
	monatlich (TM)	12	-0.06	0.58	0.19	0.20	0.67
Sodankylä	keine	10960	-0.21	-0.08	0.28	0.35	1.23
	täglich	86	-0.19	-0.12	0.34	0.39	0.86
	wöchentlich	45	-0.29	-0.13	0.39	0.48	0.90
	monatlich (EM)	26	-0.26	-0.06	0.42	0.49	0.77
	monatlich (TM)	29	-0.25	-0.07	0.42	0.48	0.63
Tsukuba	keine	47474	-0.49	-0.15	0.32	0.59	1.61
	täglich	91	-0.13	-0.21	0.34	0.36	1.56
	wöchentlich	74	-0.07	-0.23	0.27	0.28	1.56
	monatlich (EM)	38	-0.13	-0.20	0.36	0.38	1.13
	monatlich (TM)	40	0.04	-0.28	0.48	0.48	1.15

TCCON Station	Mittlung	$n_{\rm col}$	$\Delta_{\rm reg}$ [ppm]	Δ _{dri} [ppm/a]	∆ _{sea} [ppr	∆ _{spt} n [ppn	σ _{FOCAL} n [ppm]
Wollongong keine		42490	-0.04	-0.27	0.17	0.18	1.37
0 0	täglich	126	-0.12	-0.23	0.16	0.19	1.28
	wöchentlich	94	-0.09	-0.21	0.14	0.17	1.17
	monatlich	44	-0.04	-0.22	0.12	0.13	0.75
	(EM)						
	monatlich	49	-0.09	-0.22	0.21	0.23	0.88
	(TM)						
Gesamt	keine	768546	0.56	$0.03 \pm 0,25$	0.35	0.66	1.48
	täglich	2169	0.51	0.01 ± 0.28	0.34	0.62	1.28
	wöchentlich	1395	0.55	0.02 ± 0.34	0.38	0.67	1.15
	monatlich	622	0.60	0.05 ± 0.34	0.34	0.69	0.80
	(EM)						
	monatlich	677	0.55	-0.01 ± 0.33	0.38	0.67	0.90
	(TM)						